数理解析研究所講究録
第1804巻 2012年 162-177

ロジット・モデルにおける2次漸近許容性について

大阪府立大・工学研究科 尾林 千恵 (Chie Obayashi)
Graduate School of Engineering,
Osaka Prefecture University

大阪府立大・高等教育推進機構 田中 秀和 (Hidekazu Tanaka)
Faculty of Liberal Arts and Sciences,
Osaka Prefecture University

奈良教育大 高木 祥司 (Yoshiji Takagi)
Nara University of Education

1 はじめに

ロジット・モデルはロジスティック回帰モデルとも呼ばれ, 二値データの統計分析手法で最も広く使われているモデルである. Berkson [2] は, ロジット・モデルのいくつかの場合において, 最尤推定量 (以下, MLE) と最小ロジット・カイ2乗推定量 (MLχ^2E) の平均2乗誤差を数値的に計算し, 考えたすべての場合でMLχ^2Eの方がMLEより平均2乗誤差を小さくすることを示した. MLEとMLχ^2Eのどちらが良いかという問題は, Berkson's bioassay problemと呼ばれていて, 古くから様々な角度から議論されてきた. Amemiya [1] は, MLEと (ラオ・ブラックウェル化) MLχ^2Eの平均2乗誤差を$o(1/n^2)$まで漸近展開し, 数値的に (ラオ・ブラックウェル化) MLχ^2Eの方がMLEより平均2乗誤差を小さくしていることを示した. 一方, Ghosh and Sinha [3] は2次漸近許容性の概念を提案し, この観点からこの問題の解決を試みた. まず, 彼らは1母数分布の一般的な設定において2乗誤差損失関数の下で, 修正MLEが2次漸近許容的となるための必要十分条件を導出した. 特に, ロジット・モデルにおいて, 彼らはMLEは常に2次漸近非許容的であり, ラオ・ブラックウェル化MLχ^2Eはdose(独立な確率変数)の個数kが4以上のとき, またそのときに限り2次漸近許容的となることを示した. しかしながら, 多母数ロジット・モデルにおけるこれらの推定量の2次漸近許容性については明らかにされていなかった.

最近, Obayashi, Tanaka and Takagi [6] は2母数ロジット・モデルにおいて, 規準化された2乗誤差損失関数の下で, MLEとラオ・ブラックウェル化MLχ^2Eの2次漸近許容

性について考察し, 両者の2次漸近許容性と非許容性を明らかにした. そこで, 本論ではこれらの結果を3母数以上の場合に拡張する.

本論の構成は以下の通りである. まず, 第2章では本論で用いる記号や定義を与え, $p(\geq 3)$ 母数分布の一般的な設定における2次漸近許容性に関するいくつかの結果を紹介する. 第3章ではロジット・モデルにおけるMLEとラオ・ブラックウェル化MLχ^2Eの2次漸近許容性について調べる. 第4章では数学的厳密さには欠けるが, 第3章では明らかにできなかった場合のラオ・ブラックウェル化MLχ^2Eの2次漸近非許容性について考察する. 最後に第5章でいくつかの注意を与える.

2 準備

本章では, 一般的な設定において規準化された2乗誤差損失関数の下での2次漸近許容性に関する必要条件及び十分条件について述べる.

まず, $X_1, \cdots, X_n$ を互いに独立に同一の分布 P_θ に従う確率ベクトルとする. ただし, $\theta = (\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_p)' \in \mathbb{R}^p$ は未知母数であり, $p \geq 3$ とする. ここで, P_θ はある σ-有限測度に関する確率密度関数 $f(x, \theta)$ を持つものとする. さらに, 適当な正則条件 (例えば Takeuchi and Akahira [7] の (i)〜(iv)) を仮定する. このとき, 規準化された2乗誤差損失関数

$$l(\theta, \delta) := (\delta - \theta)' I(\theta)(\delta - \theta)$$

の下で θ の推定問題を考える. $R(\theta, \delta)$ を θ の推定量 δ のリスク, つまり, $R(\theta, \delta) := E_\theta[l(\theta, \delta)]$ とする. $\lambda_{\max}(\theta)$ と $\lambda_{\min}(\theta)$ をそれぞれ $I(\theta)$ の最大固有値, 最小固有値とし, $\mathrm{tr}\{A\}$ と $|A|$ をそれぞれ正方行列 A のトレース, 行列式とする. また, ベクトル値関数 $f(\theta)$ に対して, $(d/d\theta)f(\theta) := ((\partial/\partial\theta_1)f(\theta), (\partial/\partial\theta_2)f(\theta), \cdots, (\partial/\partial\theta_p)f(\theta))'$, $(d/d\theta')f(\theta) := ((d/d\theta)f(\theta))'$ とする.

Ghosh and Sinha [3] は以下のような2次漸近許容性の概念を提案した.

定義 $\mathcal{D}$ を θ の1次漸近有効な推定量のクラスとする.
(I) 以下の (i), (ii) を同時に満たす $\delta^*(\in \mathcal{D})$ が存在するならば, $n \to \infty$ のとき, $\delta(\in \mathcal{D})$ は $\mathcal{D}$ において2次漸近非許容的であるという.

(i) 任意の $\theta \in \mathbb{R}^p$ に対して, $\lim_{n\to\infty} n^2\{R(\theta, \delta^*) - R(\theta, \delta)\} \leq 0$.

(ii) ある $\theta_0 \in \mathbb{R}^p$ に対して, $\lim_{n\to\infty} n^2\{R(\theta_0, \delta^*) - R(\theta_0, \delta)\} < 0$.

(II) $n \to \infty$ のとき, $\delta(\in \mathcal{D})$ が $\mathcal{D}$ において2次漸近非許容的でないならば, $n \to \infty$ のとき, δ は $\mathcal{D}$ において2次漸近許容的であるという.

$\hat{\theta}_{\mathrm{ML}}$ を θ の MLE とし, $\hat{\theta}_c$ を関数 c による θ の修正 MLE, つまり, $\hat{\theta}_c := \hat{\theta}_{\mathrm{ML}} + c(\hat{\theta}_{\mathrm{ML}})/n$ とする. Takeuchi and Akahira [7] によると, 1次漸近有効な推定量は $o_p(1/n)$ のオーダーまでの修正 MLE を用いて表すことができる. そこで, 本論では, 推定量をクラス

$$\mathcal{D} := \left\{\hat{\theta}_c : c \in C^1(\mathbb{R}^p)\right\}$$

に制限して考える. ここで, $C^1(\mathbb{R}^p)$ は $\mathbb{R}^p$ 上の連続的微分可能な関数全体である. 以降, 2次漸近許容性は, 規準化された2乗誤差損失関数の下で $n \to \infty$ のときの $\mathcal{D}$ における2次漸近許容性を意味するものとする. $b_c(\theta)$ を $\hat{\theta}_c$ の漸近バイアス, つまり, $b_c(\theta) := \lim_{n\to\infty} nE_\theta[\hat{\theta}_c - \theta] = b_{\mathrm{ML}}(\theta) + c(\theta)$ とする. このとき, $\hat{\theta}_c$ と $\hat{\theta}_d(\in \mathcal{D})$ のリスクの差は, $n \to \infty$ のとき

$$R(\theta, \hat{\theta}_d) - R(\theta, \hat{\theta}_c) = \frac{1}{n^2}\mathrm{tr}\left\{g(\theta)g'(\theta)I(\theta) + 2b_c(\theta)g'(\theta)I(\theta) + 2\frac{d}{d\theta'}g(\theta)\right\} + o\left(\frac{1}{n^2}\right)$$

となる. ここで, $g(\theta) := d(\theta) - c(\theta)$ である. よって, 修正 MLE $\hat{\theta}_c$ が2次漸近許容的となるための必要十分条件は, 任意の $\theta \in \mathbb{R}^p$ に対して

$$\mathrm{tr}\left\{g(\theta)g'(\theta)I(\theta) + 2b_c(\theta)g'(\theta)I(\theta) + 2\frac{d}{d\theta'}g(\theta)\right\} \leq 0 \tag{2.1}$$

を満足する $g \in C^1(\mathbb{R}^p)$ が $g(\theta) = 0$ のみであることとなる.

ここで, ポテンシャル関数に対応する条件について述べる.

条件 (A1) $\hat{\theta}_c$ の漸近バイアス $b_c(\theta)$ に対して, 連続的微分可能な関数 $\gamma_c : \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}_+$ が存在して,

$$I(\theta)b_c(\theta) = \frac{d}{d\theta}\log\gamma_c(\theta)$$

が, すべての $\theta \in \mathbb{R}^p$ に対して成り立つ.

条件 (A1) の下で, (2.1) は $h(\theta) = g(\theta)\gamma_c(\theta)$ と変換することにより,

$$\frac{1}{\gamma_c(\theta)}h'(\theta)I(\theta)h(\theta) \leq -2\mathrm{tr}\left\{\frac{d}{d\theta'}h(\theta)\right\} \tag{2.2}$$

と同値である.

ここで, $\theta \in \mathbb{R}^p$ を $\theta = r\omega_\xi$ と変換する. ただし, $r > 0$,

$$\omega_\xi := \begin{pmatrix} \omega_{\xi,1} \\ \omega_{\xi,2} \\ \vdots \\ \omega_{\xi,p} \end{pmatrix}, \qquad \xi := \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_{p-1} \end{pmatrix} \in \Xi$$

であり,

$$\begin{aligned} \Xi &:= \left\{ \xi \in \mathbb{R}^{p-1} : \xi_i \in [0, \pi) \ (i = 1, \cdots, p-2),\ \xi_{p-1} \in [0, 2\pi) \right\}, \\ \omega_{\xi,i} &:= \begin{cases} \cos \xi_1 & (i = 1), \\ \cos \xi_i \prod_{j=1}^{i-1} \sin \xi_j & (i = 2, \cdots, p-1), \\ \prod_{j=1}^{p-1} \sin \xi_j & (i = p) \end{cases} \end{aligned}$$

である.

定理 1 修正 MLE $\hat{\theta}_{c_0}$ は条件 (A1) を満足し, かつ, ある $\xi_0 \in \Xi$ が存在して, すべての $\theta \in \Theta$ に対して

$$H(\theta) := \int_0^\infty \left[\frac{\lambda_{\max}(x)}{\gamma_{c_0}(x)} \right]_{x=\theta + r\omega_0} dr < \infty$$

を満足するものとする. ここで, $\omega_0 := \omega_{\xi_0}$ である. さらに, $H(\theta)$ の微分が積分記号内の微分によって得られる, つまり,

$$\frac{\partial}{\partial \theta_i} H(\theta) = \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial \theta_i} \left[\frac{\lambda_{\max}(x)}{\gamma_{c_0}(x)} \right]_{x=\theta + r\omega_0} dr \ (i = 1, \cdots, p)$$

を満足するものとする. このとき, $\hat{\theta}_{c_0}$ は 2 次漸近非許容的である.

<u>証明</u> $h(\theta) := -\omega_0 / H(\theta)$ とおく. このとき, $\lim_{r \to \infty} \lambda_{\max}(\theta + r\omega_0)/\gamma_{c_0}(\theta + r\omega_0) = 0$ な

ので,

$$\begin{aligned}
\mathrm{tr}\left\{\frac{d}{d\theta'}h(\theta)\right\} &= \frac{1}{H^2(\theta)}\int_0^\infty \frac{d}{d\theta'}\left[\frac{\lambda_{\max}(z)}{\gamma_{c_0}(z)}\right]_{z=\theta+r\omega_0}\omega_0 dr \\
&= \frac{1}{H^2(\theta)}\int_0^\infty \frac{\partial}{\partial r}\frac{\lambda_{\max}(\theta+r\omega_0)}{\gamma_{c_0}(\theta+r\omega_0)}dr \\
&= \frac{1}{H^2(\theta)}\left[\frac{\lambda_{\max}(\theta+r\omega_0)}{\gamma_{c_0}(\theta+r\omega_0)}\right]_{r=0}^\infty \\
&= -\frac{\lambda_{\max}(\theta)}{\gamma_{c_0}(\theta)H^2(\theta)}
\end{aligned}$$

を得る. それゆえに, すべての $\theta \in \mathbb{R}^p$ に対して,

$$\frac{1}{\gamma_{c_0}(\theta)}h'(\theta)I(\theta)h(\theta) + 2\mathrm{tr}\left\{\frac{d}{d\theta'}h(\theta)\right\} \leq -\frac{\lambda_{\max}(\theta)}{\gamma_{c_0}(\theta)H^2(\theta)} < 0$$

となることがわかる. ■

定理 1 は積分と微分の順序交換可能性について吟味する必要がある.

系 1 修正 MLE $\hat{\theta}_{c_0}$ は条件 (A1) を満たしているものとする. このとき, すべての $\theta_2, \cdots, \theta_p \in \mathbb{R}$ に対して,

$$\int_0^\infty \frac{\lambda_{\max}(\theta)}{\gamma_{c_0}(\theta)}d\theta_1 < \infty$$

ならば, $\hat{\theta}_{c_0}$ は 2 次漸近非許容的である.

証明　$H(\theta) := \int_{\theta_1}^\infty \{\lambda_{\max}(y,\theta_2)/\gamma_{c_0}(y,\theta_2)\}dy$ とおく. このとき, $h(\theta) = -(1/H(\theta), 0)'$ が (2.2) を満たしていることは容易に示すことができる. ■

定理 2 修正 MLE $\hat{\theta}_{c_0}$ は条件 (A1) を満たしているものとし,

$$\eta_{c_0}(r) := \int_\Xi \left[\frac{\gamma_{c_0}(\theta)}{\lambda_{\min}(\theta)}\right]_{\theta=r\omega_\xi} J(\xi)d\xi$$

とおく. ここで,

$$J(\xi) := \prod_{i=1}^{p-2}\sin^{p-i-1}\xi_i$$

である. このとき, ある $\varepsilon > 0$ に対して,

$$\lim_{M\to\infty}\int_\varepsilon^M \frac{dr}{r^{p-1}\eta_{c_0}(r)} = \infty$$

ならば, $\hat{\theta}_{c_0}$ は 2 次漸近許容的である.

証明　$u>0$ に対して, $\mathcal{D}_u := \{\theta \in \mathbb{R}^p. : |\theta| \leq u\}$ とおく. このとき, (2.2) ならば,

$$\int_{\mathcal{D}_u} \frac{1}{\gamma_{c_0}(\theta)} h'(\theta) I(\theta) h(\theta) d\theta \leq -2 \int_{\mathcal{D}_u} \mathrm{tr}\left\{\frac{d}{d\theta'} h(\theta)\right\} d\theta \tag{2.3}$$

となる. (2.3) の左辺は,

$$\int_0^u r^{p-1} G(r) dr$$

と表される. ここで,

$$G(r) := \int_\Xi \frac{1}{\gamma_{c_0}(r\omega_\xi)} h'(r\omega_\xi) I(r\omega_\xi) h(r\omega_\xi) J(\xi) d\xi$$

である. Green の公式と Schwarz の不等式を用いることにより, (2.3) の右辺は,

$$\begin{aligned}
& -2u^{p-1} \int_\Xi \omega'_\xi h(r\omega_\xi) J(\xi) d\xi \\
\leq\ & 2u^{p-1} \left\{\int_\Xi \frac{1}{\gamma_{c_0}(u\omega_\xi)} h'(u\omega_\xi) I(u\omega_\xi) h(u\omega_\xi) J(\xi) d\xi\right\}^{1/2} \\
& \times \left\{\int_\Xi \gamma_{c_0}(u\omega_\xi) \omega'_\xi I^{-1}(u\omega_\xi) \omega_\xi J(\xi) d\xi\right\}^{1/2} \\
\leq\ & 2\sqrt{u^{p-1} G(u)} \sqrt{u^{p-1} \eta_{c_0}(u)}
\end{aligned}$$

のように表される. それゆえに, すべての $0 < u < v < \infty$ に対して,

$$\int_u^v r^{p-1} G(r) dr \leq 2\left\{\sqrt{u^{p-1}G(u)}\sqrt{u^{p-1}\eta_{c_0}(u)} + \sqrt{v^{p-1}G(v)}\sqrt{v^{p-1}\eta_{c_0}(v)}\right\}$$

となることがわかる. ここで, $\gamma_{c_0}(r\omega_\xi)/\lambda_{\min}(r\omega_\xi)$ は r の連続関数なので, $\lim_{r\to 0} \eta_{c_0}(r) = \gamma_{c_0}(0) \int_\Xi J(\xi) d\xi / \lambda_{\min}(0) < \infty$ となる. したがって, Karlin [4] や Ghosh and Sinha [3] と同様の議論によって証明が得られる. ■

3　ロジット・モデルにおける2次漸近許容性

本章では, $p(\geq 3)$ 母数ロジット・モデルにおける, MLE とラオ・ブラックウェル化 MLχ^2E の 2 次漸近許容性について考える. R_i $(i = 1, \cdots, k)$ は互いに独立に二項分布 $B(n, P_i(\theta))$ に従う確率ベクトルとする. ここで,

$$P_i(\theta) := \frac{1}{1 + \exp(-x_i'\theta)}$$

であり, $\theta := (\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_p)'(\in \mathbb{R}^p)$ は未知, $x_i = (d_{i,1}, d_{i,2}, \cdots, d_{i,p})'$ は既知であり, ある $i_1 > \cdots > i_p$ に対して $|(x_{i_1}, x_{i_2}, \cdots, x_{i_p})| \neq 0$ とする. ただし, $d_{i,1} = 1$ である. $i = 1, \cdots, k$ に対して, $Y_{i1}, \cdots, Y_{in}$ を互いに独立に二項分布 $B(1, P_i(\theta))$ に従う確率ベクトルとし, $j = 1, \cdots, n$ に対して, $Z_j := (Y_{1j}, \cdots, Y_{kj})'$ とおくと, $Z_1, \cdots, Z_n$ は互いに独立に同一の分布に従う確率ベクトルとなり, 1 標本当たりのフィッシャー情報行列は,

$$I(\theta) = \sum_{i=1}^{k} P_i(\theta)(1 - P_i(\theta))x_i x_i'$$

によって与えられる. $\hat{\theta}_{\mathrm{ML}}$ を θ の MLE, $\tilde{\theta}_{\mathrm{logit}}$ を θ のラオ・ブラックウェル化 MLχ^2E とする. つまり,

$$\tilde{\theta}_{\mathrm{logit}} = \hat{\theta}_{\mathrm{ML}} + \frac{1}{n}(b_{\mathrm{logit}}(\hat{\theta}_{\mathrm{ML}}) - b_{\mathrm{ML}}(\hat{\theta}_{\mathrm{ML}}))$$

である. ここで, Amemiya [1] の結果を用いて, $\hat{\theta}_{\mathrm{ML}}$ と $\tilde{\theta}_{\mathrm{logit}}$ の両方が条件 (A1) を満たしていることを示す. まず, $l = 1, 2, \cdots, p$ に対して,

$$\frac{\partial}{\partial \theta_l} \log |I(\theta)| = \mathrm{tr}\left\{ I^{-1}(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta_l} I(\theta) \right\}$$

となる (Magnus and Neudecker [5] の定理 8.3.2). よって, Amemiya [1] における行列 $X'D_1X$, $X'D_2D_4\mathbf{1}$, $X'D_1\mathbf{1}$ は

$$\begin{aligned} X'D_1X &= nI(\theta), &(3.1)\\ X'D_2D_4\mathbf{1} &= -\frac{d}{d\theta}\log|I(\theta)|, &(3.2)\\ X'D_1\mathbf{1} &= -2\frac{d}{d\theta}\log\prod_{i=1}^{k}\left\{P_i(\theta)\exp\left(-\frac{1}{2}x_i'\theta\right)\right\} &(3.3) \end{aligned}$$

によって与えられる. (3.1), (3.2), (3.3) を Amemiya [1] の (35), (64) に代入することにより, $\hat{\theta}_{\mathrm{ML}}$ と $\tilde{\theta}_{\mathrm{logit}}$ の漸近バイアスは, それぞれ

$$\begin{aligned} b_{\mathrm{ML}}(\theta) &= I^{-1}(\theta)\frac{d}{d\theta}\log\frac{1}{\sqrt{|I(\theta)|}},\\ b_{\mathrm{logit}}(\theta) &= I^{-1}(\theta)\frac{d}{d\theta}\log\left[\frac{1}{|I(\theta)|}\prod_{i=1}^{k}\left\{P_i(\theta)\exp\left(-\frac{1}{2}x_i'\theta\right)\right\}\right] \end{aligned}$$

となり, $\hat{\theta}_{\mathrm{ML}}$ と $\tilde{\theta}_{\mathrm{logit}}$ は,

$$\begin{aligned} \gamma_{\mathrm{ML}}(\theta) &= \frac{1}{\sqrt{|I(\theta)|}}, &(3.4)\\ \gamma_{\mathrm{logit}}(\theta) &= \frac{1}{|I(\theta)|}\prod_{i=1}^{k}\left\{P_i(\theta)\exp\left(-\frac{1}{2}x_i'\theta\right)\right\} &(3.5) \end{aligned}$$

とすることにより, 条件 (A1) を満たしていることがわかる.

定理 1 と定理 2 をロジット・モデルに適用するために, いくつかの補題を準備する.

補題 1 フィッシャー情報行列 $I(\theta)$ について,

$$|I(\theta)| = \sum_{i_1>\cdots>i_p} P_{i_1}(\theta)(1-P_{i_1}(\theta))\cdots P_{i_p}(\theta)(1-P_{i_p}(\theta))|(x_{i_1}, x_{i_2}, \cdots, x_{i_p})|^2$$

が成り立つ.

<u>証明</u> S_p を p 次の対称群とし, $\mathrm{sgn}(\sigma)$ を $\sigma \in S_p$ の指標とする. $I(\theta)$ の (α, β) 成分は $I_{\alpha\beta}(\theta) = \sum_{i=1}^k P_i(\theta)(1-P_i(\theta))d_{i,\alpha}d_{i,\beta}$ であるので,

$$\begin{aligned}
|I(\theta)| &= \sum_{\sigma\in S_p}\mathrm{sgn}(\sigma)\sum_{i_1=1}^k P_{i_1}(\theta)(1-P_{i_1}(\theta))d_{i_1,1}d_{i_1,\sigma(1)}\cdots\sum_{i_p=1}^k P_{i_p}(\theta)(1-P_{i_p}(\theta))d_{i_p,p}d_{i_p,\sigma(p)} \\
&= \sum_{i_1=1}^k\cdots\sum_{i_p=1}^k P_{i_1}(\theta)(1-P_{i_1}(\theta))\cdots P_{i_p}(\theta)(1-P_{i_p}(\theta))d_{i_1,1}\cdots d_{i_p,p} \\
&\quad \times\sum_{\sigma\in S_p}\mathrm{sgn}(\sigma)d_{i_1,\sigma(1)}\cdots d_{i_p,\sigma(p)} \\
&= \sum_{i_1=1}^k\cdots\sum_{i_p=1}^k P_{i_1}(\theta)(1-P_{i_1}(\theta))\cdots P_{i_p}(\theta)(1-P_{i_p}(\theta))d_{i_1,1}\cdots d_{i_p,p}|(x_{i_1}, x_{i_2}, \cdots, x_{i_p})| \\
&= \sum_{\sigma\in S_p}\sum_{i_{\sigma(1)}>i_{\sigma(2)}>\cdots>i_{\sigma(p)}} P_{i_1}(\theta)(1-P_{i_1}(\theta))\cdots P_{i_p}(\theta)(1-P_{i_p}(\theta)) \\
&\quad \times d_{i_1,1}\cdots d_{i_p,p}|(x_{i_1}, x_{i_2}, \cdots, x_{i_p})|
\end{aligned}$$

となる. ここで, $i_{\sigma(1)} = i_1, \cdots, i_{\sigma(p)} = i_p$ とおくと,

$$\begin{aligned}
|I(\theta)| &= \sum_{\sigma\in S_p}\sum_{i_1>i_2>\cdots>i_p} P_{i_1}(\theta)(1-P_{i_1}(\theta))\cdots P_{i_p}(\theta)(1-P_{i_p}(\theta)) \\
&\quad \times d_{i_{\sigma^{-1}(1)},1}\cdots d_{i_{\sigma^{-1}(p)},p}|(x_{i_{\sigma^{-1}(1)}}, \cdots, x_{i_{\sigma^{-1}(p)}})| \\
&= \sum_{i_1>i_2>\cdots>i_p} P_{i_1}(\theta)(1-P_{i_1}(\theta))\cdots P_{i_p}(\theta)(1-P_{i_p}(\theta)) \\
&\quad \times\sum_{\sigma\in S_p} d_{i_{\sigma(1)},1}\cdots d_{i_{\sigma(p)},p}|(x_{i_{\sigma(1)}}, \cdots, x_{i_{\sigma(p)}})|\mathrm{sgn}(\sigma) \\
&= \sum_{i_1>i_2>\cdots>i_p} P_{i_1}(\theta)(1-P_{i_1}(\theta))\cdots P_{i_p}(\theta)(1-P_{i_p}(\theta))|(x_{i_1}, x_{i_2}, \cdots, x_{i_p})|^2
\end{aligned}$$

を得る. ■

補題 2 任意の $\theta_1 > 0,\ \theta_2, \cdots, \theta_p \in \mathbb{R}$ に対して, 次の不等式が成り立つ.

(i) $\mathrm{tr}\{I(\theta)\} \leq C_{d1}(\theta_{\{1\}})e^{-\theta_1}$.

(ii) $|I(\theta)| \leq C_{d2}(\theta_{\{1\}})e^{-p\theta_1}$.

(iii) $\displaystyle\prod_{i=1}^{k}\left\{P_i(\theta)\exp\left(-\frac{1}{2}x_i'\theta\right)\right\} \geq C_{d3}(\theta_{\{1\}})\exp\left(-\frac{k}{2}\theta_1\right)$.

ここで,

$$
\begin{aligned}
d &:= (d_{i,j})_{i=1,2,\cdots,p,\ j=1,2,\cdots,k}, \\
C_{d1}(\theta_{\{1\}}) &:= \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{p} d_{i,j}^2 \exp\left(\sum_{m=2}^{p}|d_{i,m}\theta_m|\right), \\
C_{d2}(\theta_{\{1\}}) &:= \sum_{i_1>i_2>\cdots>i_p} |(x_{i_1}, x_{i_2}, \cdots, x_{i_p})|^2 \exp\left(\sum_{s=1}^{p}\sum_{m=2}^{p}|d_{i_s,m}\theta_m|\right), \\
C_{d3}(\theta_{\{1\}}) &:= \frac{1}{2^k}\exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{k}\sum_{m=2}^{p}|d_{i,m}\theta_m|\right)
\end{aligned}
$$

である.

<u>証明</u> 任意の $\theta_1 > 0,\ \theta_2, \cdots, \theta_p \in \mathbb{R}$ に対して,

$$
P_i(\theta)(1-P_i(\theta)) \leq \exp(-|x_i'\theta|) \leq \exp\left(-\theta_1 + \sum_{m=2}^{p}|d_{i,m}\theta_m|\right)
$$

となることは容易にわかる. また,

$$
\mathrm{tr}\{I(\theta)\} = \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{p} d_{i,j}^2 P_i(\theta)(1-P_i(\theta))
$$

なので, (i) を得る. また, 補題 1 より (ii) を得る. さらに,

$$
\begin{aligned}
P_i(\theta)\exp\left(-\frac{1}{2}x_i'\theta\right) &= \frac{1}{\exp(x_i'\theta/2)+\exp(-x_i'\theta/2)} \\
&\geq \frac{1}{2}\exp\left(-\frac{1}{2}|x_i'\theta|\right) \geq \frac{1}{2}\exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\theta_1 + \sum_{m=2}^{p}|d_{i,m}\theta_m|\right)\right\}
\end{aligned}
$$

も容易に示すことができる. このことから, (iii) を得る. ■

補題 3 $l_i \neq l_j$ に対して,

$$\Xi := \left\{\xi \in \mathbb{R}^{p-1} : \xi_i \in [0,\pi)\ (i=1,\cdots,p-2),\ \xi_{p-1} \in [0,2\pi)\right\},$$
$$\Xi_{l_1,\cdots,l_p} := \left\{\xi \in \Xi : |x'_{l_1}\omega_\xi| < |x'_{l_2}\omega_\xi| < \cdots < |x'_{l_p}\omega_\xi| < |x'_i\omega_\xi|\ (i \neq l_1,\cdots,l_p)\right\}$$

とおく. 任意の $\xi \in \Xi_{l_1,l_2,\cdots,l_p}$, 任意の $r>0$ に対して, 次の不等式が成り立つ.

(i) $\mathrm{tr}\{I(r\omega_\xi)\} \leq C_{d4}\exp(-r|x'_{l_1}\omega_\xi|)$.

(ii) $|I(r\omega_\xi)| \geq C_{d5}\exp\left(-r\sum_{m=1}^{p}|x'_{l_m}\omega_\xi|\right)$.

(iii) $\prod_{i=1}^{k}\left\{P_i(r\omega_\xi)\exp\left(-\frac{r}{2}x'_i\omega_\xi\right)\right\} \leq \exp\left(-\frac{r}{2}\sum_{i=1}^{k}|x'_i\omega_\xi|\right)$.

ここで,

$$\begin{aligned} C_{d4} &:= \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{p} d_{i,j}^2, \\ C_{d5} &:= \frac{1}{4^p}|(x_{l_1},x_{l_2},\cdots,x_{l_p})|^2, \end{aligned}$$

である.

<u>証明</u> 任意の $\xi \in \Xi_{l_1,l_2,\cdots,l_p}$, 任意の $r>0$ に対して,

$$\frac{1}{4}\exp(-r|x'_i\omega_\xi|) \leq P_i(r\omega_\xi)(1-P_i(r\omega_\xi)) \leq \exp(-r|x'_i\omega_\xi|)$$

となるので,

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}\{I(r\omega_\xi)\} &= \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{p} d_{i,j}^2 P_i(r\omega_\xi)(1-P_i(r\omega_\xi)) \\ &\leq \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{p} d_{i,j}^2 \exp(-r|x'_i\omega_\xi|) \\ &\leq \exp(-r|x'_{l_1}\omega_\xi|)\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{p} d_{i,j}^2, \end{aligned}$$

及び, 補題 1 より,

$$\begin{aligned} |I(r\omega_\xi)| &\geq \frac{1}{4^p}\sum_{i_1>\cdots>i_p}|(x_{i_1},x_{i_2},\cdots,x_{i_p})|^2\exp\left(-r\sum_{m=1}^{p}|x'_{i_m}\omega_\xi|\right) \\ &\geq \frac{1}{4^p}|(x_{l_1},x_{l_2},\cdots,x_{l_p})|^2\exp\left(-r\sum_{m=1}^{p}|x'_{l_m}\omega_\xi|\right) \end{aligned}$$

を得る. さらに, 不等式

$$P_i(r\omega_\xi)\exp\left(-\frac{r}{2}x_i'\omega_\xi\right) = \frac{1}{\exp(rx_i'\omega_\xi/2)+\exp(-rx_i'\omega_\xi/2)} \le \exp\left(-\frac{r}{2}|x_i'\omega_\xi|\right)$$

から (iii) を得る. ■

定理 3 $\hat{\theta}_{\mathrm{ML}}$ は常に 2 次漸近非許容的である.

<u>証明</u> $\lambda_{\max}(\theta) \le \mathrm{tr}\{I(\theta)\}$ は容易に示すことができる. (3.4) と補題 2 から, 任意の $\theta_1 > 0, \theta_2, \cdots, \theta_p \in \mathbb{R}$ に対して,

$$\begin{aligned}\frac{\lambda_{\max}(\theta)}{\gamma_{\mathrm{ML}}(\theta)} &\le \sqrt{|I(\theta)|}\ \mathrm{tr}\{I(\theta)\} \\ &\le C_{d1}(\theta_{\{1\}})\sqrt{C_{d2}(\theta_{\{1\}})}\ \exp\left\{-\frac{1}{2}(p+2)\theta_1\right\}\end{aligned}$$

となることがわかる. それゆえに,

$$\int_0^\infty \frac{\lambda_{\max}(\theta)}{\gamma_{\mathrm{ML}}(\theta)}d\theta_1 \le \int_0^\infty C_{d1}(\theta_{\{1\}})\sqrt{C_{d2}(\theta_{\{1\}})}\ \exp\left\{-\frac{1}{2}(p+2)\theta_1\right\}d\theta_1 < \infty$$

となり, 系 1 より $\hat{\theta}_{\mathrm{ML}}$ は 2 次漸近非許容的であることがわかる. ■

定理 4 $\tilde{\theta}_{\mathrm{logit}}$ は, $p \le k \le 2p+1$ のとき 2 次漸近非許容的である.

<u>証明</u> 定理 3 の証明と同様にして, 任意の $\theta_1 > 0, \theta_2, \cdots, \theta_p \in \mathbb{R}$ に対して,

$$\begin{aligned}\frac{\lambda_{\max}(\theta)}{\gamma_{\mathrm{logit}}(\theta)} &\le \frac{|I(\theta)|\ \mathrm{tr}\{I(\theta)\}}{\prod_{i=1}^{k}\left\{P_i(\theta)\exp\left(-\frac{1}{2}x_i'\theta\right)\right\}} \\ &\le \frac{C_{d1}(\theta_{\{1\}})C_{d2}(\theta_{\{1\}})}{C_{d3}(\theta_{\{1\}})}\exp\left\{-\frac{1}{2}(2p+2-k)\theta_1\right\}\end{aligned}$$

となることがわかる. それゆえに, 系 1 より, $p \le k \le 2p+1$ のとき $\tilde{\theta}_{\mathrm{logit}}$ は 2 次漸近非許容的であることがわかる. ■

定理 5 $\tilde{\theta}_{\mathrm{logit}}$ は, 任意の $\xi \in \Xi$ に対して,

$$2(p-1)|x_{l_1}'\omega_\xi| - 4\sum_{m=1}^{p}|x_{l_m}'\omega_\xi| + \sum_{m=1}^{k}|x_{l_m}'\omega_\xi| > 0 \tag{3.6}$$

となるとき, 2 次漸近許容的である. ここで

$$|x_{l_1}'\omega_\xi| < |x_{l_2}'\omega_\xi| < \cdots < |x_{l_k}'\omega_\xi|$$

である. 特に, $k \ge 4p-3$ のとき, $\tilde{\theta}_{\mathrm{logit}}$ は 2 次漸近許容的である.

<u>証明</u>　まず, $\eta_{\text{logit}}(r)$ が

$$\eta_{\text{logit}}(r)=\sum_{l_i\neq l_j}\int_{\Xi_{l_1,l_2,\cdots,l_p}}\frac{\gamma_{\text{logit}}(r\omega_\xi)}{\lambda_{\min}(r\omega_\xi)}d\xi.$$

と表せることに注意する. ここで, $\Xi_{l_1,l_2,\cdots,l_p}$ は補題3で定義されたものである.

$$\frac{1}{\lambda_{\min}(\theta)}\leq\frac{\mathrm{tr}^{p-1}\{I(\theta)\}}{|I(\theta)|}$$

であるので, (3.5) と補題3から, 任意の $\xi\in\Xi_{l_1,l_2,\cdots,l_p}$, $r>0$ に対して,

$$\begin{aligned}\frac{\gamma_{\text{logit}}(r\omega_\xi)}{\lambda_{\min}(r\omega_\xi)} &\leq \frac{\mathrm{tr}^{p-1}\{I(r\omega_\xi)\}}{|I(r\omega_\xi)|^2}\prod_{i=1}^{k}\left\{P_i(r\omega_\xi)\exp\left(-\frac{r}{2}x_i'\omega_\xi\right)\right\}\\ &\leq C_{d6}\exp\left\{-\frac{r}{2}\left(2(p-1)|x_{l_1}'\omega_\xi|-4\sum_{m=1}^{p}|x_{l_m}'\omega_\xi|+\sum_{m=1}^{k}|x_{l_m}'\omega_\xi|\right)\right\}.\end{aligned}$$

となることがわかる. ここで, C_{d6} は定数である. (3.6) が成り立つとき, $\lim_{r\to\infty}r^{p-1}\times\eta_{\text{logit}}(r)=0$ となり, 定理2より定理の前半を得る. 特に, $p\geq 3$ に注意すると,

$$\begin{aligned}k\geq 4p-3 &\Leftrightarrow -3(p-1)+(k-p)>0\\ &\Rightarrow (2p-5)|x_{l_1}'\omega_\xi|-3\sum_{m=2}^{p}|x_{l_m}'\omega_\xi|+\sum_{m=p+1}^{k}|x_{l_m}'\omega_\xi|>0\\ &\Leftrightarrow 2(p-1)|x_{l_1}'\omega_\xi|-4\sum_{m=1}^{p}|x_{l_m}'\omega_\xi|+\sum_{m=1}^{k}|x_{l_m}'\omega_\xi|>0\end{aligned}$$

となることが示せるので, 定理の後半を得る. ■

4　考察

定理4と定理5だけでは, $\tilde{\theta}_{\text{logit}}$ の2次漸近許容性と非許容性を判定できない場合がある. この点については, 残念ながら現在のところ納得のいく結果が得られていない状況である. 本章では, 数学的な厳密さには欠けるが, 定理1での積分と微分の順序交換可能性を認めた上で, この未解明な場合について考察する.

定理1を適用するため, 次の補題を準備する.

補題 4 任意の $\theta\in\mathbb{R}^p$, 任意の $r>0$, 任意の $\xi\in\Xi_{l_1,\cdots,l_p}$ に対して, 次の不等式が成り立つ.

(i) $\mathrm{tr}\{I(\theta + r\omega_\xi)\} \le C_{d7}(\theta)\exp(-r|x'_{l_1}\omega_\xi|)$.

(ii) $|I(\theta + r\omega_\xi)| \le C_{d8}(\theta)\exp\left(-r\sum_{m=1}^{p}|x'_{l_m}\omega_\xi|\right)$.

(iii) $\prod_{i=1}^{k}\left\{P_i(\theta + r\omega_\xi)\exp\left(-\frac{1}{2}x'_i(\theta + r\omega_\xi)\right)\right\} \ge C_{d9}(\theta)\exp\left(-\frac{r}{2}\sum_{i=1}^{k}|x'_i\omega_\xi|\right)$.

ここで,

$$\begin{aligned}
C_{d7}(\theta) &:= \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{p}\exp(|x'_i\theta|)d_{i,j}^2, \\
C_{d8}(\theta) &:= \sum_{i_1>\cdots>i_p}|(x_{i_1}, x_{i_2}, \cdots, x_{i_p})|^2\exp\left(\sum_{n=1}^{p}|x'_{i_n}\theta|\right), \\
C_{d9}(\theta) &:= \frac{1}{2^k}\exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{k}|x'_i\theta|\right),
\end{aligned}$$

である.

<u>証明</u>　任意の $\theta \in \mathbb{R}^p$, 任意の $r > 0$, 任意の $\xi \in \Xi_{l_1,\cdots,l_p}$ に対して,

$$P_i(\theta + r\omega_\xi)(1 - P_i(\theta + r\omega_\xi)) \le \exp(|x'_i\theta|)\exp(-r|x'_i\omega_\xi|)$$

となるので,

$$\begin{aligned}
\mathrm{tr}\{I(\theta + r\omega_\xi)\} &= \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{p}d_{i,j}^2 P_i(\theta + r\omega_\xi)(1 - P_i(\theta + r\omega_\xi)) \\
&\le \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{p}d_{i,j}^2\exp(|x'_i\theta|)\exp(-r|x'_i\omega_\xi|) \\
&\le \exp(-r|x'_{l_1}\omega_\xi|)\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{p}\exp(|x'_i\theta|)d_{i,j}^2,
\end{aligned}$$

及び

$$\begin{aligned}
|I(\theta + r\omega_\xi)| &\le \sum_{i_1>\cdots>i_p}|(x_{i_1}, x_{i_2}, \cdots, x_{i_p})|^2\exp\left(\sum_{m=1}^{p}|x'_{i_m}\theta|\right)\exp\left(-r\sum_{m=1}^{p}|x'_{i_m}\omega_\xi|\right) \\
&= C_{d8}(\theta)\exp\left(-r\sum_{m=1}^{p}|x'_{l_m}\omega_\xi|\right)
\end{aligned}$$

を得る. さらに, 不等式

$$
\begin{aligned}
P_i(\theta + r\omega_\xi)\exp\left(-\frac{1}{2}x_i'(\theta + r\omega_\xi)\right) &= \frac{1}{\exp(x_i'(\theta + r\omega_\xi)/2) + \exp(-x_i'(\theta + r\omega_\xi)/2)} \\
&\geq \frac{1}{2}\exp\left(-\frac{1}{2}|x_i'(\theta + r\omega_\xi)|\right) \\
&\geq \frac{1}{2}\exp\left(-\frac{1}{2}|x_i'\theta|\right)\exp\left(-\frac{r}{2}|x_i'\omega_\xi|\right)
\end{aligned}
$$

から (iii) を得る. ■

ここで, ある $\xi_0 \in \Xi$ が存在して,

$$
\frac{\partial}{\partial\theta_i}\int_0^\infty \left[\frac{\lambda_{\max}(x)}{\gamma_{\mathrm{logit}}(x)}\right]_{x=\theta+r\omega_0} dr = \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial\theta_i}\left[\frac{\lambda_{\max}(x)}{\gamma_{\mathrm{logit}}(x)}\right]_{x=\theta+r\omega_0} dr \quad (i = 1, \cdots, p)
$$

が成り立っているものとする. このとき, 補題4より, 任意の $\theta \in \mathbb{R}^p$, 任意の $r > 0$, 任意の $\xi \in \Xi_{l_1,\cdots,l_p}$ に対して,

$$
\begin{aligned}
\frac{\lambda_{\max}(\theta + r\omega_0)}{\gamma_{\mathrm{logit}}(\theta + r\omega_0)} &\leq \frac{|I(\theta + r\omega_0)|\ \mathrm{tr}\{I(\theta + r\omega_0)\}}{\prod_{i=1}^{k}[P_i(\theta + r\omega_0)\exp\{-x_i'(\theta + r\omega_0)/2\}]} \\
&\leq C_{d10}(\theta)\exp\left\{-\frac{r}{2}\left(2|x_{l_1}'\omega_0| + 2\sum_{m=1}^{p}|x_{l_m}'\omega_0| - \sum_{m=1}^{k}|x_{l_m}'\omega_0|\right)\right\}
\end{aligned}
$$

となることがわかる. それゆえに, 定理1より

$$
2|x_{l_1}'\omega_0| + 2\sum_{m=1}^{p}|x_{l_m}'\omega_0| - \sum_{m=1}^{k}|x_{l_m}'\omega_0| > 0
$$

となるとき, $\tilde{\theta}_{\mathrm{logit}}$ は2次漸近非許容的であることが示される. ここで

$$
|x_{l_1}'\omega_0| < |x_{l_2}'\omega_0| < \cdots < |x_{l_k}'\omega_0|
$$

である.

5 まとめ

1母数ロジット・モデルにおいて, Ghosh and Sinha [3] は2乗誤差損失関数の下で, MLE は常に2次漸近非許容的であり, ラオ・ブラックウェル化 MLχ^2E は dose の個数 k

が 4 以上のとき，またそのときに限り 2 次漸近許容的となることを示した．[3] で使われた損失関数は，本論で用いたものとは異なるが，1 母数モデルにおいて，2 乗誤差損失関数の下での許容性の結果は，規準化された 2 乗誤差損失関数の下での結果と一致していることは容易に示すことができる．表 1 に規準化された 2 乗誤差損失関数の下での Ghosh and Sinha [3], Obayashi, Tanaka and Takagi [6] と本論での結果をまとめた．ロジット・モデルの設定から，dose の個数 k は母数 p 以上なので，$**$ の部分は考えられない．また，SOI$^\blacklozenge$ は，第 4 章で考察したものだが，議論に用いた定理 1 での積分と微分の順序交換の正当化ができていない部分である．なお，表 1 の ？ は，まだ未解決な部分として残されている．これは今後の課題である．

表 1. 4 母数までの MLE とラオ・ブラックウェル化 MLχ^2E の許容性と非許容性

<table>
<tr><th colspan="2"></th><th>G & S
[1 母数]</th><th>O & T & T
[2 母数]</th><th>O & T & T
[3 母数]</th><th>O & T & T
[4 母数]</th></tr>
<tr><td colspan="2">MLE($\hat{\theta}_{\mathrm{ML}}$)</td><td>SOI</td><td>SOI</td><td>SOI</td><td>SOI</td></tr>
<tr><td rowspan="10">R-B
MLχ^2E
($\tilde{\theta}_{\mathrm{logit}}$)</td><td>$k=1$</td><td rowspan="3">SOI</td><td>**</td><td rowspan="2">**</td><td rowspan="3">**</td></tr>
<tr><td>$k=2$</td><td rowspan="4">SOI</td></tr>
<tr><td>$k=3$</td><td rowspan="4">SOI</td></tr>
<tr><td>$k=4$</td><td rowspan="7">SOA</td><td rowspan="5">SOI</td></tr>
<tr><td>$k=5$</td></tr>
<tr><td>$k=6,7$</td><td rowspan="5">SOA</td></tr>
<tr><td>$k=8$</td><td>SOI$^\blacklozenge$/?/SOA</td></tr>
<tr><td>$k=9$</td><td rowspan="3">SOA</td></tr>
<tr><td>$k=10,11,12$</td><td>SOI$^\blacklozenge$/?/SOA</td></tr>
<tr><td>$k\geq 13$</td><td>SOA</td></tr>
</table>

参考文献

[1] Amemiya, T. The n^{-2}-order mean squared errors of the maximum likelihood and the minimum chi-square estimator. *Ann. Statist.*, **9**, 488–505 (1980).

[2] Berkson, J. Maximum likelihood estimates of the logistic function. *J. Amer. Statist. Assoc.*, **50**, 130–162 (1955).

[3] Ghosh, J. K. and Sinha, B. K. A necessary and sufficient condition for second order admissibility with applications to Berkson's bioassay problem. *Ann. Statist.*, **9**, 1334–1338 (1981).

[4] Karlin, S. Admissibility for estimation with quadratic loss. *Ann. Math. Statist.*, **29**, 406–436 (1958).

[5] Magnus, J. R. and Neudecker, H. *Matrix differential calculus with applications in statistics and econometrics.* Wiley Series in Probability and Mathematical Statistics: Applied Probability and Statistics. John Wiley & Sons, Ltd., Chichester (1988).

[6] Obayashi, C., Tanaka, H. and Takagi Y. 2母数ロジット・モデルにおける2次漸近許容性. 「統計的推測の理論と方法論, 及び, 最近の動向」シンポジウム講演予稿集 61–69 (2011).

[7] Takeuchi, K. and Akahira, M. Asymptotic optimality of the generalized Bayes estimator in multiparameter cases. *Ann. Inst. Statist. Math.* **31**, 403–415 (1979).